

Оценка влияния дислокационных петель и дислокаций несоответствия на распределение Ge в пленке SiGe/Si

А.А. Бычков

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Аннотация: Выполнен расчет равновесного распределения Ge и плотности упругой энергии в полупроводниковой пленке SiGe/Si. Построена трехмерная модель плоской пленки с пирамидальными островками и дислокациями. Расчет упругих деформаций выполнен с использованием метода конечных элементов. В рассматриваемой модели учитывается неоднородное распределение Si и Ge из-за проникающих дислокаций, напряжений несоответствия и дислокационных петель. Обнаружено, что при учете неоднородности распределения компонент сплава переход к образованию эпитаксиальных островков на поверхности пленки наступает при меньших значениях их критического размера, что особенно заметно при малых концентрациях Ge в сплаве.

Ключевые слова: германий, тонкая пленка, гетероэпитаксия, SiGe, дислокации несоответствия, проникающая дислокация, плотность упругой энергии, дислокационная петля.

Введение

Известно, что в гетероэпитаксиальных полупроводниковых пленках релаксация упругой энергии осуществляется, в частности, посредством следующих механизмов: образования дислокаций несоответствия [1] и неоднородного распределения компонент сплава. Как правило, дислокации несоответствия появляются на неровностях поверхности пленки, а далее, под воздействием напряжений несоответствия, перемещаются к границе пленка – подложка. При этом в случае SiGe пленки на Si подложке происходит сжатие пленки. Дислокации несоответствия перемещаются по плоскостям $\{111\}$, находящихся под углом 60° к плоскости (001) подложки (вектор Бюргерса $a/2[101]$). 60° дислокации расположенные по соседству пересекаются и, таким образом, вступают в дислокационную реакцию $a/2[\bar{1}01] + a/2[01\bar{1}] = a/2[\bar{1}10]$, в результате чего образуется дислокация Ломера – краевая дислокация с вектором Бюргерса $a/2[110]$ параллельным плоскости (001) подложки. Если плоскости перемещения $\{111\}$ пересекаются не точно на гетерогранице, то ближайшие 60° дислокации или их отдельные

ветви либо смещаются в подложку до линии пересечения наклонных плоскостей перемещения, либо смещаются в пленку. Напряжения, вызванные 60° дислокациями и дислокациями Ломера имеют знак противоположный знаку напряжений несоответствия, вызываемых когерентной границей, и обеспечивают, таким образом, релаксацию упругой энергии в образце.

Еще один механизм релаксации напряжений в гетероэпитаксиальной пленке *SiGe/Si* – неоднородное распределение атомов *Ge* и *Si*, за счет различия их размеров, в островках и поблизости от волнистой поверхности пленки [2]. Причем, в случае плоской поверхности атомы сплава равномерно распределены в пленке. Так, расчет [3] показал, что по сравнению со случаем равномерного распределения компонент *SiGe*, для волнистой поверхности пленки, при неравномерном распределении компонент средняя плотность упругой энергии уменьшается на 9%. Перераспределение атомов *Ge* и *Si* вызвано процессами механо диффузии в пленке. При температуре превышающей 873° К доминирует вклад энергии перемешивания, а при более низких температурах роста основной вклад в формирование островка обеспечивает упругая энергия [4]. Кремниево-германиевые гетероструктуры, здесь, представляют особый интерес в связи с их широким применением в электронике [5, 6].

Анализ компонент сплава *SiGe* вблизи дислокации Ломера выполнен в [7], с учетом энергии перемешивания и упругой энергии дислокаций. В частности, результаты исследования продемонстрировали, что для островка в форме усеченной пирамиды, расположение дислокации несоответствия в основании существенно изменяет распределение атомов *Ge*: без дислокации доля атомов *Ge* увеличивается в вершине пирамиды, а при наличии дислокации несоответствия часть атомов *Ge* располагаются вблизи ядра дислокации. При этом в [8] показано, что в случае линейной зависимости несоответствия $f = C_u$ от высоты плоской пленки, положение равновесия

первой дислокации несоответствия определяется расстоянием y_C от границы пленка – подложка. Значение y_C изменяется в пределах 6-11% от критической толщины пленки.

Постановка задачи

В представленной работе исследована релаксация гетероэпитаксиальной пленки посредством энергии деформации. В модели предполагается изменение упругой энергии под действием дислокаций несоответствия, проникающих дислокаций и дислокационных петель, а также из-за неоднородного распределения компонент сплава $SiGe$ пленки.

Для рассматриваемой модели упругая задача имеет вид

$$\begin{aligned}\sigma_{ij,j} &= 0, \quad \Omega \\ u_i &= 0, \quad \Gamma_D \\ \sigma_{ij}n_j &= 0, \quad \Gamma_N\end{aligned}$$

здесь Γ_N - свободная граница пленки, Γ_D - граница пленка-подложка, $\Gamma_D \cup \Gamma_N$ - граница тела, Ω - область занимаемая телом [9]. $\varepsilon_{ij}^* = \varepsilon_m c(x, y, z) \delta_{ij}$ - деформация несоответствия [10], $\varepsilon_m = 0,04$. Закон Гука будет иметь следующий вид: $\sigma_{ij} = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^*)$.

Для участка поверхности образца, изменение знака приращения свободной энергии δF при наложении возмущения на первоначально плоскую пленку определяет потерю устойчивости ее равновесия

$$\delta F = \int_{\Gamma_N} \gamma dS + \int_{\Omega} w dV - \gamma_0 S_0 - W_0,$$

здесь S_0 - площадь свободной поверхности плоской пленки, $\gamma = c\gamma_{Ge} + (1-c)\gamma_{Si}$ - удельная поверхностная энергия, γ_{Si} и γ_{Ge} - удельная поверхностная энергия соответственно для Si и Ge , γ_0 - удельная поверхностная энергия плоской пленки, W_0 - упругая энергия плоской

пленки, $c = c(x, y, z)$ - доля Ge в сплаве, w – плотность упругой энергии на поверхности образца:

$$w = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij}.$$

Расчет выполнен для трехмерных моделей с помощью метода конечных элементов, в пакете FlexPDE. Схема расположения дислокаций в пирамидальном островке на поверхности полупроводниковой пленки показана на рис.1.

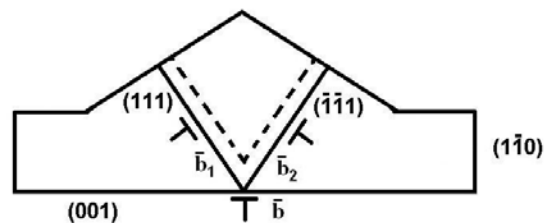


Рис. 1. – Пирамидальный островок на поверхности пленки, со схемой расположения проникающих дислокаций и дислокаций несоответствия

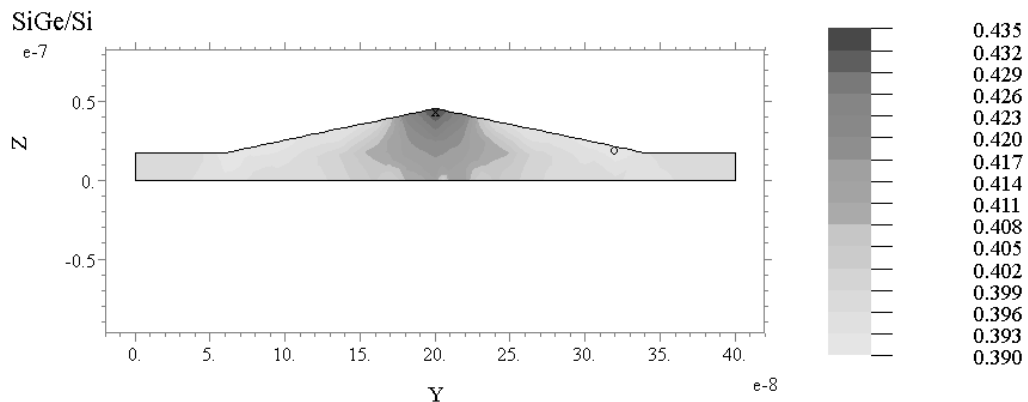


Рис. 2. – Распределение Ge в островке $SiGe$ в форме полной пирамиды на смачивающем слое без дислокации, в сечении образца вдоль оси OY (средняя доля Ge : $\bar{c} = 0,4$; размер исследуемой области образца: 400×400 нм)

Обсуждение результатов

На рис.2 представлен пример распределения доли атомов Ge в пленке, не содержащей дислокации, с пирамидальным островком. На рис.3 показаны результаты расчета δF . Изменение знака δF определяет переход от плоской

формы к островковой форме поверхности пленки. Кривые соответствуют различной средней доле Ge в сплаве, от 35 до 50%. Результаты расчетов показали, что в двухкомпонентном упругом слое $SiGe$ положение равновесия дислокации несоответствия находится в глубине пленки, а не на границе раздела пленка-подложка, что соответствует результатам полученным в [8]. Этот вывод относится и к проникающим дислокациям, при этом перемена ориентации дислокации значительно изменяет поле упругих напряжений и распределение компонент Si и Ge в пленке. Результаты расчета модели образца, включающего призматическую дислокационную петлю, показали существенное ее влияние на значение упругой энергии пленки.

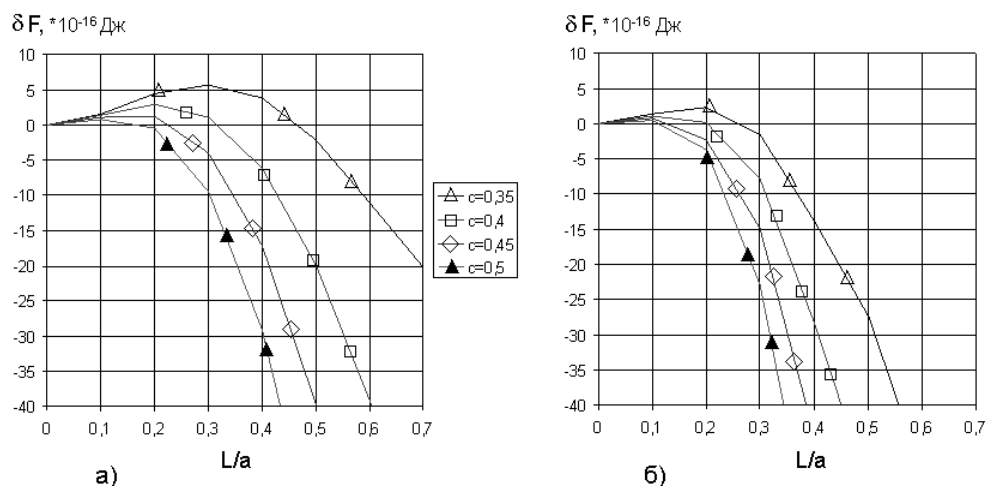


Рис. 3. – Зависимость приращения свободной энергии δF островка в форме усеченной пирамиды от L/a - отношения длины основания пирамиды к длине образца: (а) без учета механоdiffузии $c = \bar{c}$; (б) с учетом механоdiffузии, $c=c(x,y,z)$.

Выводы

Согласно проведенным расчетам, при учете неоднородности распределения компонент сплава переход к образованию эпитаксиальных островков на поверхности пленки наступает при меньших значениях их

критического размера, что особенно заметно при малых долях Ge в сплаве $SiGe$.

Литература

1. Ovidko I.A., Sheinerman A.G. Misfit dislocations in nanocomposites with quantum dots, nanowires and their ensembles // *Advances in Physics*, 2006, V.55. Nos.7-8. pp. 627-689.
2. Aqua J.N., Berbezier I., Favre L., Frisch T., Ronda A. Growth and self-organization of SiGe nanostructures // *Physics Reports*, 2013. V.522. pp.59-189.
3. Wu C.-C., Hull R. Composition and stress fields in undulated thin films // *J. Appl. Phys.*, 2006. V.100. 083510.
4. Wang D.-L., Yu Z.-Y., Liu Y.-M., Ye H., Lu P.-F., Zhao L., Guo X.-T. The equilibrium composition in $GexSi1-x/Si$ self-assembled alloy quantum dot // *Chin. Phys. B*, 2010. V.19. No.8. 086801.
5. Евдокимов В.Д. Исследование быстроедействия SiGe ГБТ при переходе к суб-100 нм проектной норме // *Инженерный вестник Дона*, 2015, №3 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2015/3230.
6. Адамов Ю.Ф., Гулякович Г.Н., Северцев В.Н. Учет влияния подложки на высокочастотные характеристики кремниевых транзисторов // *Инженерный вестник Дона*, 2012, №2 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2012/791.
7. Ye H., Lu P.F., Yu Z.Y., Wang D.L., Chen Z.H., Liu Y.M., Wang S.M. Dislocation-induced compositional profile in alloy semiconductors // *Solid State Communications*, 2010. V.150. pp.1275-1278.
8. Sidoti D., Xhuxhi S., Kujofsa S., Cheruku S., Correa J.P., Bertoli B., Rago P.B., Suarez E.N., Jain F.C., Ayers J.E. Initial misfit dislocations in a graded heteroepitaxial layer // *J. Appl. Phys.*, 2011. V.109. 023510.

9. Бычков А.А., Карпинский Д.Н. Механизмы релаксации упругой энергии в тонкой полупроводниковой пленке на подложке // Вестник ТГУ, т.18, вып.3, 2013, с.1811-1912.

10. Digioni D., Gatti R., Montalenti F. Aspect-ratio-dependent driving force for nonuniform alloying in Stranski-Krastanow islands // Physical Review, 2009. V. 80. 155436.

References

1. Ovidko I.A., Sheinerman A.G. Advances in Physics, 2006, V.55. Nos.7-8. pp. 627-689.

2. Aqua J.N., Berbezier I., Favre L., Frisch T., Ronda A. Physics Reports, 2013. V.522. pp.59-189.

3. Wu C.-C., Hull R. J. Appl. Phys., 2006. V.100. 083510.

4. Wang D.-L., Yu Z.-Y., Liu Y.-M., Ye H., Lu P.-F., Zhao L., Guo X.-T. Chin. Phys. B, 2010. V.19. No.8. 086801.

5. Evdokimov V.D. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2015, №3 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2015/3230.

6. Adamov Ju.F., Guljakovich G.N., Severcev V.N. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2012, №2 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2012/791.

7. Ye H., Lu P.F., Yu Z.Y., Wang D.L., Chen Z.H., Liu Y.M., Wang S.M. Solid State Communications, 2010. V.150. pp.1275-1278.

8. Sidoti D., Xhuxhi S., Kujofsa S., Cheruku S., Correa J.P., Bertoli B., Rago P.B., Suarez E.N., Jain F.C., Ayers J.E. J. Appl. Phys., 2011. V.109. 023510.

9. Bychkov A.A., Karpinskij D.N. Vestnik TGU, t.18, v.3, 2013, pp.1811-1912.

10. Digioni D., Gatti R., Montalenti F. Physical Review, 2009. V. 80. 155436.